非定常对流扩散方程的无条件稳定高精度紧致差分格式

杨志峰[1]　陈国谦[2]

([1] 环境模拟和污染控制国家联合重点实验室——水环境模拟分室，北京师范大学环境科学研究所，北京 100875；[2] 中国科学院力学研究所，北京 100080)

关键词　差分格式、对流-扩散、非定常、高精度、L_2 稳定

对流扩散方程描述流体流动与传质规律的基本过程，如确定环境流动中污染物的时空分布一般均归结为对该方程的数值求解．由于对流作用较难把握，而给数值求解带来诸多困扰——“伪”耗散与弥散．作为解决问题的基本手段，高精度差分方法倍受重视．Rai[1] 采用高阶插值构造了这一方程的五阶精度差分格式，其中每一空间方向含有 11 个差分点．之后，Roger & Kwak[2] 发展了三阶和五阶迎风格式，每一空间方向所含差分点数减少到 7 个．由于这类格式的非紧致性(格式中包含差分点数过多)，致使系数矩阵带宽加大、计算量增加；而且由于边界附近差分网格不能自由延伸，使其精度大大降低(一般仅为一阶)，在整体上大大抵销了高精度所带来的益处．另一种方法是采用分步技术[3—5]，即将对流扩散过程分解为对流与扩散，应用高精度插值方法构造各分步高精度格式．这类方法除了兼有上述缺陷或需增加求解附加方程(组)外，尚会引入分步误差，使整体精度受到限制．鉴于此，紧致高精度差分方法受到重视[6—10]．近期，Dennis & Hundson[7] 发展了对流扩散型方程的四阶紧致差分格式，该格式不分步，且仅含相邻结点，在一定程度上避免了上述两方法中的困扰．但多维情况仅限于定常问题；一维情况可推广至非定常问题，但处理较繁．更为遗憾的是，Dennis & Hundson 格式未能很好反映对流的“迎风”效应，不适用于对流占优问题[8]．陈国谦等[9] 发展的摄动四阶紧致差分格式可确保对流的迎风性，但亦尚待推广至非定常问题．

杨志峰等[10] 发展了非定常对流扩散方程的四阶紧致差分格式，时间两层(单步)、空间仅含相邻结点(即三点)，且可应用于对流占优问题．本文将以此为基础进一步改进．

1　差分格式

一维非定常对流扩散方程

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}+u\frac{\partial \varphi}{\partial x}=D\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \tag{1}$$

的四阶紧致差分格式[10] 可归结为

1992-05-29 收稿．

$$C_i\varphi_i=C_{i-1}\varphi_{i-1}+C_{i+1}\varphi_{i+1}+C^{\circ}_{i-1}\varphi^{\circ}_{i-1}+C^{\circ}_i\varphi^{\circ}_i+C^{\circ}_{i+1}\varphi^{\circ}_{i+1}. \tag{2}$$

这里上标“°”表示上一时刻，各差分系数

$$C_i=(a_2b_1-a_1b_2)(a_2c_3-a_3c_2)+(a_3b_2-a_2b_3)(a_2c_1-a_1c_2), \tag{3a}$$

$$C_{i-1}=a_2(b_3c_2-b_2c_3)\exp(\frac{uh}{2D}), \tag{3b}$$

$$C_{i+1}=a_2(b_3c_2-b_2c_3)\exp(-\frac{uh}{2D}), \tag{3c}$$

$$C^{\circ}_i=a_2(a_2c_3-a_3c_2), \tag{3d}$$

$$C^{\circ}_{i-1}=a_2(a_3b_2-a_2b_3)\exp(\frac{uh}{2D}), \tag{3e}$$

$$C^{\circ}_{i+1}=a_2(a_3b_2-a_2b_3)\exp(-\frac{uh}{2D}), \tag{3f}$$

其中

$$a_1=2,\ a_2=h^2,\ a_3=h^4/12, \tag{4}$$

$$b_1=\sum_{i=0}^{N}\frac{1}{i!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^i, \tag{5a}$$

$$b_2=-D\tau\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{(i-1)!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^{i-1}, \tag{5b}$$

$$b_3=\frac{1}{2}(D\tau)^2\sum_{i=2}^{N}\frac{1}{(i-2)!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^{i-2}, \tag{5c}$$

$$c_1=2\sum_{i=0}^{N}\frac{1}{i!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^i, \tag{6a}$$

$$c_2=(h^2-2D\tau)\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{(i-1)!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^{i-1}, \tag{6b}$$

$$c_3=(h^4/12-D\tau h^2+D^2\tau^2)\sum_{i=2}^{N}\frac{1}{(i-2)!}\left(\frac{u^2\tau}{4D}\right)^{i-2}. \tag{6c}$$

式中 u 为对流流速，D 是扩散系数，τ 和 h 分别为时间和空间步长，N 是正整数，依级数收敛要求取值(显然，N 愈大精度愈高)．

本文作进一步推导和改进．注意利用

$$e^x=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}x^i=\sum_{i=1}^{\infty}\frac{1}{(i-1)!}x^{(i-1)}=\sum_{i=2}^{\infty}\frac{1}{(i-2)!}x^{(i-2)},$$

$N\to\infty$ 时，(5)，(6) 式变为

$$b_1=E,\quad b_2=-D\tau E,\quad b_3=\frac{1}{2}(D\tau)^2E, \tag{7}$$

$$c_1=2E,\quad c_2=(h^2-2D\tau)E,\quad c_3=(h^4/12-D\tau h^2+D^2\tau^2)E, \tag{8}$$

$$E=\exp(\frac{u^2\tau}{4D}).$$

将(4)式及(8)式和(9)式代入(3)式和(2)式，整理后(2)式各系数可简化为

$$C_i=2(6r+5), \tag{9a}$$
$$C_{i-1}=(6r-1)\exp[\mathrm{sign}(u)P_\Delta/2], \tag{9b}$$
$$C_{i+1}=(6r-1)\exp[-\mathrm{sign}(u)P_\Delta/2], \tag{9c}$$
$$C_i^{\circ}=2(5-6r)\exp[-r(P_\Delta/2)^2], \tag{9d}$$
$$C_{i-1}^{\circ}=(6r+1)\exp[\mathrm{sign}(u)P_\Delta/2-r(P_\Delta/2)^2], \tag{9e}$$
$$C_{i+1}^{\circ}=(6r+1)\exp[-\mathrm{sign}(u)P_\Delta/2-r(P_\Delta/2)^2], \tag{9f}$$

式中 $r=D\tau/h^2$, $P_\Delta=|u|h/D$ 定义为网格 Peclet 数.

由于函数 φ 与 $\varphi+c$(其中 c 是一任意常数)两者均为方程(1)的解,差分方程(2)亦应反映这一特性,这就要求差分系数具有如下关联式:

$$C_i=C_{i-1}+C_{i+1}+C_i^{\circ}+C_{i-1}^{\circ}+C_{i+1}^{\circ}. \tag{10}$$

但是,由(9)式可看出,差分方程(2)在 P_Δ 较大时偏离这一条件较远. 为对由此所带来的偏差有所纠正,我们以(10)式取代(9a)式,即

$$C_i=2(5-6r)\exp[-r(P_\Delta/2)^2]+2(6r+1)\cosh(P_\Delta/2)\exp[-r(P_\Delta/2)^2]+2(6r-1)\cosh(P_\Delta/2). \tag{11}$$

显然,本文格式基于文献[10]格式的等价变形,但其表述大大得到简化,且更直观、易解. 该格式很好地体现了对流的"迎风"性和非定常问题的"历经"性: 差分系数随流速 u 方向、大小的改变自动调整,上游系数恒大于下游系数,且随着 u 的增加,上游贡献(C_{i-1} 和 C_{i-1}°, $u>0$; C_{i+1} 和 C_{i+1}°, $u<0$)增大,下游减小且逐渐趋于零; 同样,时间步长愈大(反映为 $r=D\tau/h^2$ 增加),上时段贡献(C_i°, C_{i-1}° 和 C_{i+1}°)亦愈小且渐为零.

2　精度和稳定性分析

2.1　差分格式的精度

将(9b)—(9f)式和(11)式代入基本差分式(2),可推得格式的等价方程为

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+u\frac{\partial\varphi}{\partial x}=D\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+h^4A_6(r)\frac{\partial\varphi}{\partial x^6}+O(h^6\sum_{i=0}^{4}r^{i-1}). \tag{12}$$

这里 $A_6(r)=\dfrac{1}{12}(r^2-\dfrac{1}{20})$.

一般讲,格式具有 $O(h^4, \tau^2)$ 精度,$r=O(1)$ 时达四阶 $O(h^4)$; 但值得指出的是,$r=\dfrac{\sqrt{5}}{10}$ 时 $A_6(r)=0$,格式精度提高至六阶 $O(h^6)$.

2.2　差分格式的稳定性

采用 Fourier 分析方法,对任一 k 波型 Fourier 分量,扰动误差放大系数

$$G=\frac{C_i^{\circ}+C_{i-1}^{\circ}e^{-ikh}+C_{i+1}^{\circ}e^{ikh}}{C_i-(C_{i-1}e^{-ikh}+C_{i+1}e^{ikh})}.$$

考虑到(10)或(11)式,G 之模 $|G|\leqslant 1$ 恒成立,故格式具有无条件稳定性(L_2 稳定).

本文讨论限于线性问题,对于非线性情况,作者将另文专载,对含有污染源汇的对流扩散方程,可在本文格式基础上,通过反演法[11]确定其高精度紧致差分格式. 限于篇幅,不再赘述.

参 考 文 献

[1] Rai, M. M., Navier-Stokes simulation of blade-vortex interaction using high-order accurate upwind schemes, AIAA paper 87-0543, 1987.

[2] Roger, S. E., Kwak, D., Upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier-stokes equations, *AIAI J.*, 1990, **28**(2):253—262.

[3] Glass, J., Rodi, W., *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1982, **31**:337—358.

[4] Yang, G. L. *et al.*, *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, 1991, **12**:43—58.

[5] 何光渝，水动力学研究与进展，1988, **3**(3):14—19.

[6] Hirsh, R. S., *J. Comp. Phys.*, 1975, **19**(1):90—109.

[7] Dennis, S. C. R., Hundson, J. D., *J. Comp. Phys.*, 1989, **85**(2): 390—416.

[8] 陈国谦、杨志峰，中国博士后论文集，北京大学出版社，1991, 4:132—141.

[9] 陈国谦、杨志峰、高 智，计算物理，1991, **8**(4):132—141.

[10] 杨志峰、周雪漪、许协庆，水动力学研究与进展，1991, **6**(1):113—119.

[11] 杨志峰、周同明，北京师范大学学报(自然科学版)，1992, **28**(1):124—128.